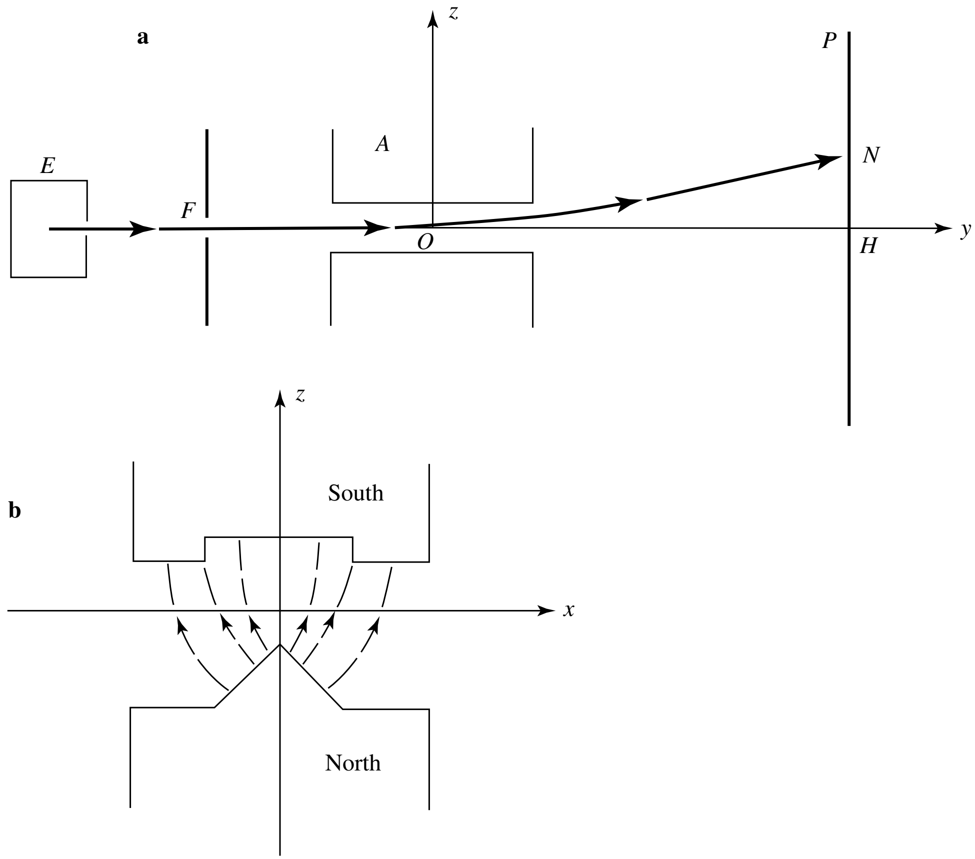
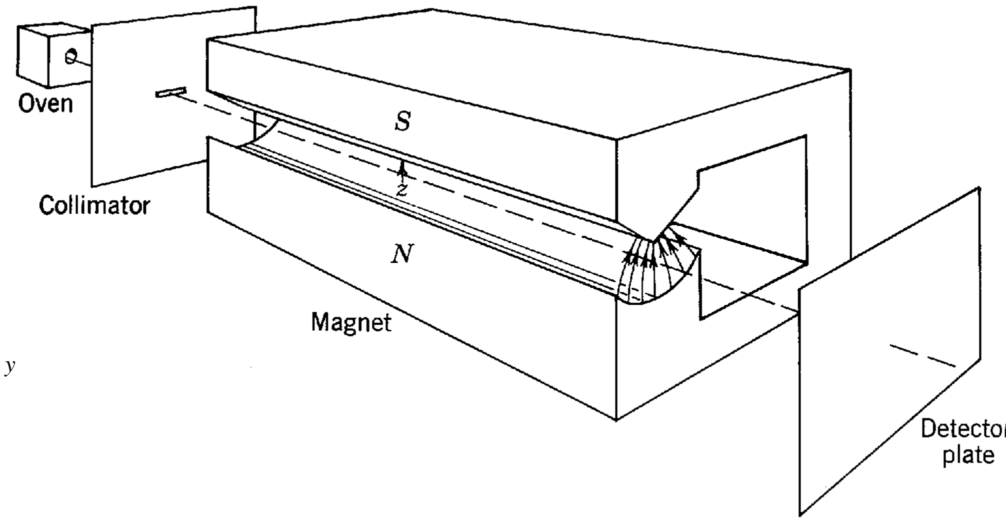
F 689 – Mecânica Quântica I

2º Semestre de 2022
26/10/2022
Aula 18

Aula passada

Aparato experimental de Stern-Gerlach: um feixe de átomos neutros percorre uma região com campo magnético não uniforme.





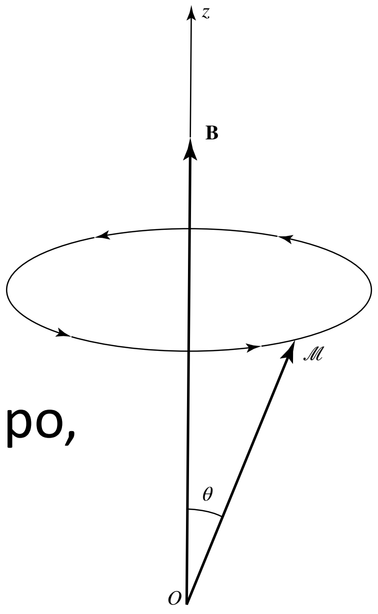
Aula passada

Descrição clássica: os átomos de prata têm carga zero, mas um momento magnético não nulo $\mathbf{M}$.

O momento magnético é proporcional ao momento angular $\mathbf{L}$: $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{L}$

Os átomos estão sujeitos a torques devido ao campo magnético: precessão de Larmor. Na média, só sobrevive a componente L_z.

$$\mathbf{N} = \mathbf{M} \times \mathbf{B} \Rightarrow \frac{d\mathbf{L}}{dt} = \gamma \mathbf{L} \times \mathbf{B} \Rightarrow \overline{\mathbf{L}} = L_z \hat{\mathbf{z}}$$



Os átomos sofrem uma força devido à não homogeneidade do campo, proporcional a L_z:

$$\mathbf{F} = \boldsymbol{\nabla}(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}) = \left(\gamma \frac{\partial B_z}{\partial z}\right) L_z$$

A deflexão devido à força é proporcional a L_z: o aparato mede L_z

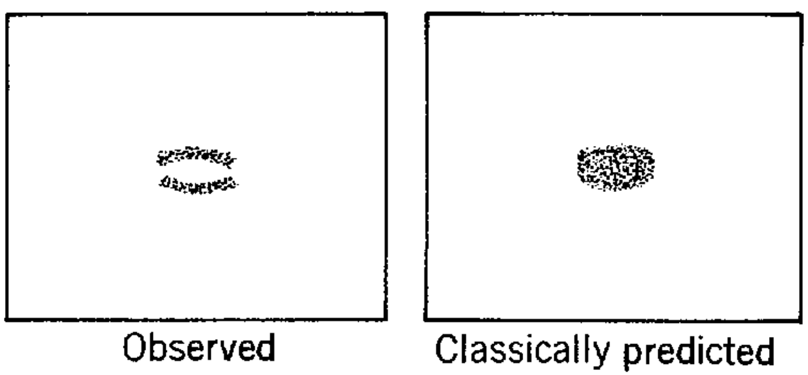
Aula passada

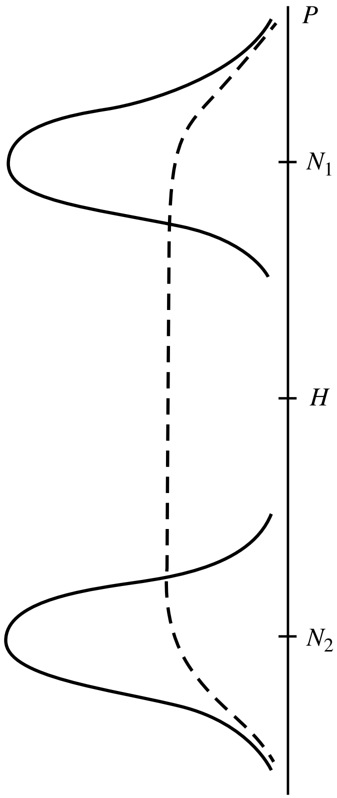
Classicamente, esperam-se deflexões em um intervalo contínuo:

$$L_z \in [-|\mathbf{L}|, |\mathbf{L}|]$$

Ao contrário, observam-se apenas dois valores discretos de L_z

$$L_z = -\frac{\hbar}{2} \quad \text{ou} \quad \frac{\hbar}{2}$$





Aula passada

Descrição quântica do momento angular de spin ½: espaço $\mathcal{E}$ de dimensão 2.

$$\text{Base de } \mathcal{E} \Rightarrow \{|+\rangle, |-\rangle\} \qquad \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1, \ \langle +|-\rangle = 0$$

Fechamento: $|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1}$

Observável associado a $L_z \rightarrow S_z$

$$\boxed{\begin{aligned} S_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ S_z |-\rangle &= -\frac{\hbar}{2}|\cancel{+}\rangle \end{aligned}}$$

Outras componentes (representação matricial **na base acima**):

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Matrizes de Pauli:

$$\boxed{\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Aula passada

Componente genérica do spin numa direção arbitrária **u**:

$$\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{u}} \equiv S_u = S_x \sin\theta \cos\phi + S_y \sin\theta \sin\phi + S_z \cos\theta$$

Representação matricial de S_u:

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

Qualquer projeção de **S** tem os mesmos auto-valores:

$$\mathrm{Auto-valores\ de}\ S_x, S_y, S_z, S_u \rightarrow \pm\frac{\hbar}{2}$$

Aula passada

Na $\mathrm{Base\ de}\ \mathcal{E} \Rightarrow \{|+\rangle, |-\rangle\}$, os auto-vetores das componentes de $\mathbf{S}$ são:

Para S_x e S_y:

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm |-\rangle\right]$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm i\,|-\rangle\right]$$

Para S_u (convenção de fase diferente da do livro):

$$|+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

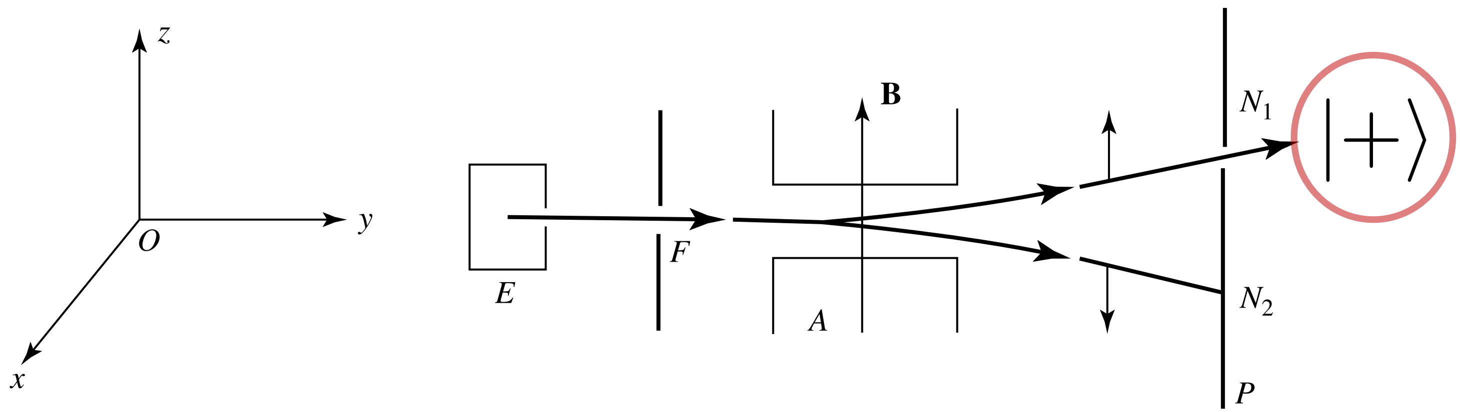
$$|-\rangle_u = -\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

Para S_u (convenção do livro):

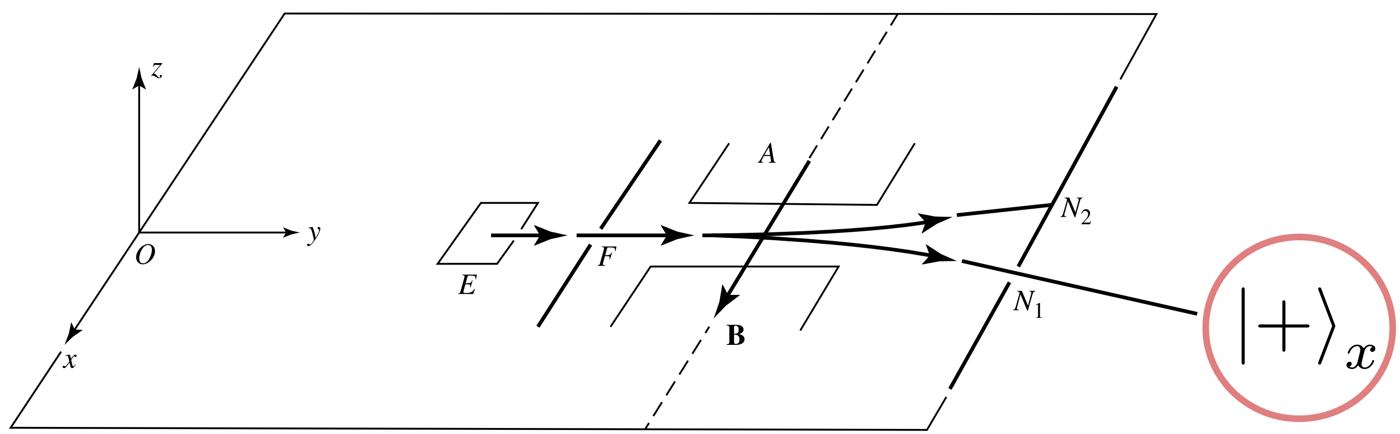
$$e^{i\phi/2} \times \left\{ \begin{aligned} |+\rangle_u &= e^{-i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle \\ |-\rangle_u &= -e^{-i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle \end{aligned} \right.$$

Aula passada

Preparação de estados: $|+\rangle\,,|-\rangle$



Preparação de estados: $|+\rangle_x\,,|-\rangle_x$



Preparação de estados: girando o aparato apropriadamente $\rightarrow$ $|+\rangle_u\,,|-\rangle_u$

Preparação de estados genéricos

UM ESTADO QUALQUER DE $\mathcal{E}$:

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$

$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

PODE SER ESCRITO COMO $|+\rangle_u$

AJUSTANDO APROPRIADAMENTE θ, ϕ

PROVA: $|\alpha| = \cos\frac{\theta}{2}$; $|\beta| = \sin\frac{\theta}{2}$

$\tan\frac{\theta}{2} = \frac{|\beta|}{|\alpha|}$

$$\alpha = e^{i\lambda_1}\cos\frac{\theta}{2} \quad ; \quad \beta = \sin\frac{\theta}{2} e^{i\lambda_2}$$

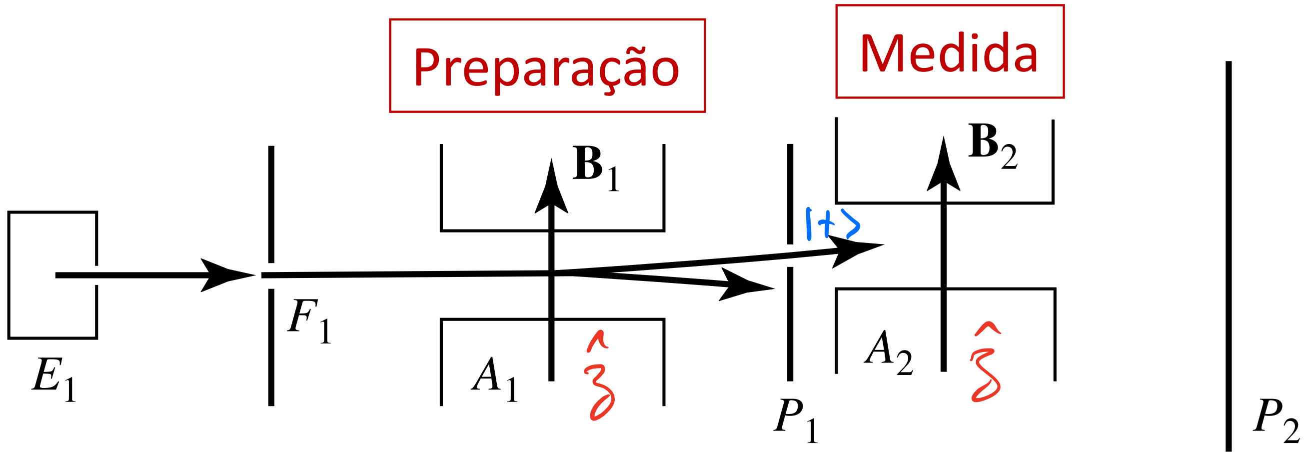
$$\lambda_1 = \mu - \frac{\phi}{2} \quad ; \quad \lambda_2 = \mu + \frac{\phi}{2} \Leftrightarrow \mu = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \quad ; \quad \phi = \lambda_2 - \lambda_1$$

$$|\psi\rangle = e^{i\mu} e^{-i\phi/2} \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\mu} e^{+i\phi/2} \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

$$= e^{i\mu}\left[e^{-i\phi/2}\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi/2}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right] = e^{i\mu}|+\rangle_u$$

Testando os postulados

Experimento 1:



$|\psi'\rangle = |+\rangle$

APÓS O 1º S-G, O SISTEMA É PREPARADO NO ESTADO $|+\rangle$

NO 2º S-G, MEDE-SE S_z

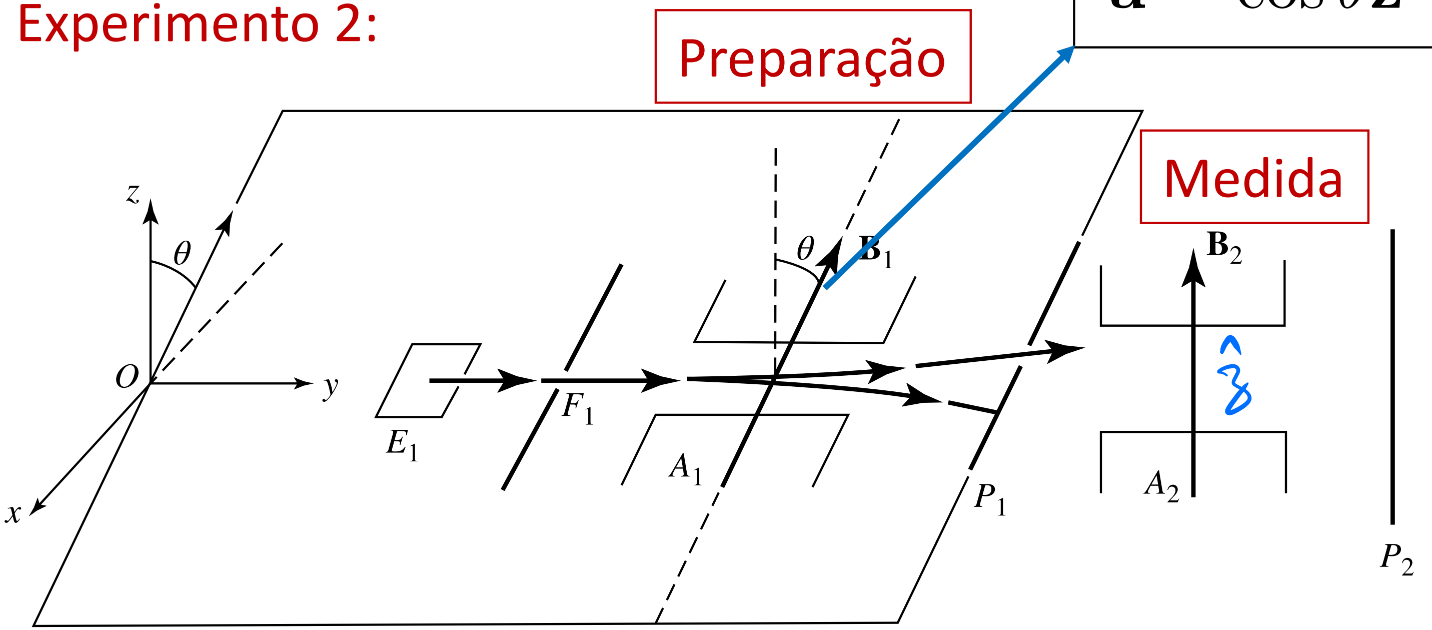
$$P\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = 1 = |\langle +|\psi'\rangle|^2 = |\langle +|+\rangle|^2 = 1$$

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 0 = |\langle -|\psi'\rangle|^2 = |\langle -|+\rangle|^2 = 0$$

Experimento 2:

$$\hat{\mathbf{u}} = \cos\theta\,\hat{\mathbf{z}} + \sin\theta\,\hat{\boldsymbol{x}}$$

$\theta, \phi = 0$



1º S-G: PREPARA O SISTEMA NO ESTADO:

$$|+\rangle_\theta = |+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + \cancel{e^{i\phi}}^{\,1}\sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle$$

2º S-G: S_z

$$P\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle + | + \rangle_u|^2 = \cos^2\frac{\theta}{2}$$

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle - | + \rangle_u|^2 = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

$$|z_1+z_2|^2 = |z_1|^2+|z_2|^2+2\,\mathrm{Re}[z_1^* z_2]$$

Experimento 3: 1º SG PREPARA NO ESTADO:

$$|+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle$$

O 2º SG MEDE S_x:

$$P\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = |{}_x\langle +|+\rangle_u|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle +| + \langle -|\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle\right)\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left|\cos\frac{\theta}{2} + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\right|^2 = \frac{1}{2}\Big[\underbrace{\cos^2\frac{\theta}{2}+\sin^2\frac{\theta}{2}}_{1} + \underbrace{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}_{\sin\theta}\cos\phi\Big]$$

$$P\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1+\sin\theta\cos\phi\right)$$

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1-\sin\theta\cos\phi\right)$$

Valores médios

VALORES MÉDIOS DE S_x, S_y, S_z EM ESTADOS GENÉRICOS:

1) NO ESTADO $|+\rangle_\theta = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$:

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} - \frac{\hbar}{2}\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

2) ESTADO GENÉRICO: $|+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{4}(\cancel{1}+\sin\theta\cos\phi) - \frac{\hbar}{4}(\cancel{1}-\sin\theta\cos\phi)$$

$$= \frac{\hbar}{4}\sin\theta\,(2\cos\phi) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi$$

ALTERNATIVAMENTE: 1) ${}_\theta\langle +|S_z|+\rangle_\theta = \left(\cos\frac{\theta}{2}\ \ \sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}\hbar/2 & 0\\ 0 & -\hbar/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$

$$= \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

DADO :

$$|+\rangle_u = \cos\frac{\theta}{2}\,|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|-\rangle$$

1) $${}_u\langle +|S_x|+\rangle_u = \frac{\hbar}{2}\left(\cos\frac{\theta}{2} \quad e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\theta/2\\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\phi$$

2) $${}_u\langle +|S_y|+_u\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\qquad\qquad\right)\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\\ \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\phi$$

3) $${}_u\langle +|S_z|+\rangle_u = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

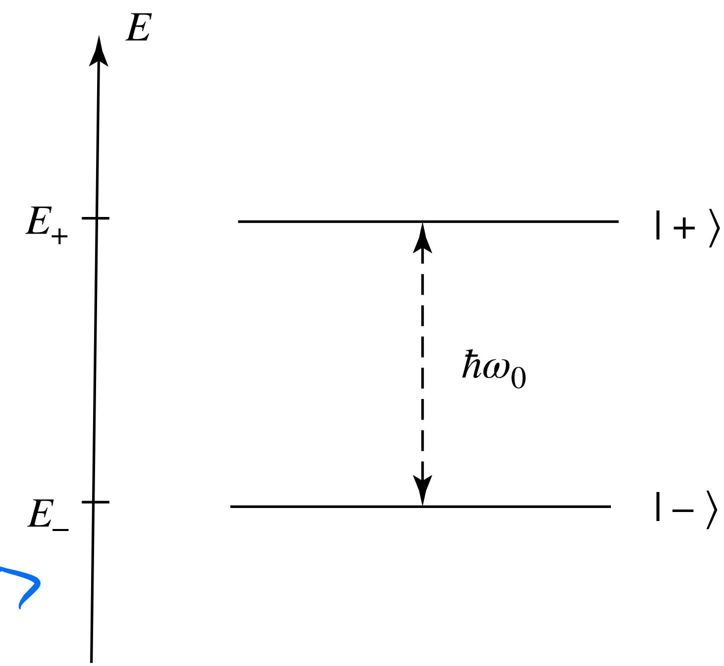
$$\boxed{{}_u\langle +|\vec{S}|+\rangle_u = \frac{\hbar}{2}\hat{u}}$$

$\langle \vec{S}\rangle = \frac{\hbar}{2}\hat{u}$ = VETOR CLÁSSICO NA DIREÇÃO $\hat{u}$ COM MÓDULO $\frac{\hbar}{2}$

Dinâmica em um campo magnético

Hamiltoniano (energia de um momento magnético num campo externo):

$$H = -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} = -\gamma\mathbf{L}\cdot\mathbf{B} = -\gamma B_0 S_z \equiv \omega_0 S_z$$



$\omega_0 = -\gamma B_0 > 0$

AUTO-VETORES/VALORES DE H:

$$H|+\rangle = \omega_0 S_z|+\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle = E_+|+\rangle$$

$$H|-\rangle = \omega_0 S_z|-\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle = E_-|-\rangle$$

FREQUÊNCIA DE BOHR:

$$\nu = \frac{E_+ - E_-}{h} = \frac{\hbar\omega_0}{h} = \frac{\omega_0}{2\pi} \equiv \nu_0$$

SUPONHA O ESTADO INICIAL GENÉRICO:

$$|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2}\, |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2}\, |-\rangle \equiv |+\rangle_u$$

QUAL É $|\psi(t)\rangle$?

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2}\, e^{-iE_+t/\hbar}\, |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2}\, e^{-iE_-t/\hbar}\, |-\rangle$$

$$= \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\phi/2}\, e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}\, |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2}\, e^{+i\frac{\omega_0 t}{2}}\, |-\rangle$$

$$= \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i(\phi+\omega_0 t)/2}\, |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i(\phi+\omega_0 t)/2}\, |-\rangle$$

OU SEJA, PARA $t\neq 0$, O ESTADO $|+\rangle_u$ MANTÉM A SUA FORMA COM: $\theta(t)=\theta$ $\quad \phi(t)=\phi+\omega_0 t$.

$$\langle S_x\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\phi+\omega_0 t)$$

$$\langle S_y\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin(\phi+\omega_0 t)$$

OSCILAM NA ÚNICA FREQUÊNCIA DE BOHR, JÁ QUE $[S_x, H]\neq 0$, $[S_y, H]\neq 0$

$$\langle S_z\rangle(t) = \frac{\hbar}{2}\cos\theta \longrightarrow \text{CONSTANTE, JÁ QUE } [H, S_z]=0$$

$$\langle \vec{S} \rangle (t) = \frac{\hbar}{2} \hat{u}(t)$$

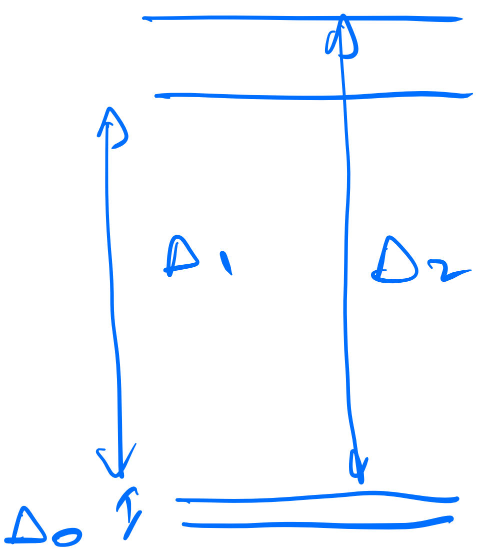
$$\hat{u}(t) = [\sin\theta \cos(\phi + \omega_0 t)\hat{x} + \sin\theta \sin(\phi + \omega_0 t)\hat{y} + \cos\theta \hat{z}]$$

QUE É A PRECESSÃO DE LARMOR.

ISSO JUSTIFICA A ANÁLISE CLÁSSICA DO S-G ATRAVÉS DA QUAL, DESPREZAMOS AS COMPONENTES DE $\vec{L}$ (OU $\vec{S}$) $\perp$ A $\vec{B}$ APÓS PROMEDIAÇÃO TEMPORAL.

Sistemas de dois níveis

FISICAMENTE, É COMUM QUE A ESTRUTURA DE NÍVEIS DE UM SISTEMA SEJA DO TIPO:



$$\Delta_1, \Delta_2, \ldots >> \Delta_0$$

DOIS NÍVEIS MUITO PRÓXIMOS, MUITO SEPARADOS DOS OUTROS NÍVEIS

É CONVENIENTE SEPARAR O HAMILTONIANO DO PROBLEMA EM DUAS PARTES: $H = H_0 + W$ $\quad \|W\| << \|H_0\|$

$$H_0|\varphi_1\rangle = E_1|\varphi_1\rangle$$
$$H_0|\varphi_2\rangle = E_2|\varphi_2\rangle$$

ESPAÇO GERADO PELA BASE $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ $\quad \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$

$$H|\psi_+\rangle = E_+|\psi_+\rangle \qquad \langle\psi_s|\psi_{s'}\rangle = \delta_{s,s'}$$

$$H|\psi_-\rangle = E_-|\psi_-\rangle \qquad s = \pm$$

NA BASE $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$: $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$

NA MESMA BASE: $W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix}$ $\quad W_{11}, W_{22} \in \mathbb{R}$, $\quad W_{12} = W_{21}^* \in \mathbb{C}$

É CLARO QUE: $|\psi_s\rangle \to |\varphi_i\rangle$ QUANDO $W \to$

NESSA BASE:

$$H = H_0 + W = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{E}_1 & W_{12} \\ W_{21} & \tilde{E}_2 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{E}_1 = E_1 + W_{11} \; ; \; \tilde{E}_2 = E_2 + W_{22}$$

Rearranjando o Hamiltoniano

$$H = \begin{pmatrix} \widetilde{E}_1 & W_{12} \\ W_{21} & \widetilde{E}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overbrace{\frac{\widetilde{E}_1+\widetilde{E}_2}{2}}^{E_m} & 0 \\ 0 & \underbrace{\frac{\widetilde{E}_1+\widetilde{E}_2}{2}}_{E_m} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \overbrace{\frac{\widetilde{E}_1-\widetilde{E}_2}{2}}^{\Delta} & W_{12} \\ W_{21} & \underbrace{-\frac{\widetilde{E}_1-\widetilde{E}_2}{2}}_{-\Delta} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} E_m & 0 \\ 0 & E_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta & W_{12} \\ W_{21} & -\Delta \end{pmatrix} = E_m \mathbb{1} + \begin{pmatrix} \Delta & W_{12} \\ W_{21} & -\Delta \end{pmatrix}$$

onde: $E_m = \dfrac{\widetilde{E}_1 + \widetilde{E}_2}{2}$

$\Delta = \dfrac{\widetilde{E}_1 - \widetilde{E}_2}{2}$

$W_{12} = a + ib$

$W_{21} = a - ib$

$$\begin{pmatrix} \Delta & W_{12} \\ W_{12} & -\Delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta & a+ib \\ a-ib & -\Delta \end{pmatrix} = \Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + a \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - b \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \Delta \sigma_z + a \sigma_x - b \sigma_y$$